

СПЕКАНИЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ UO_2 ОКТАЭДРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ ПРИ КОНТАКТЕ ВДОЛЬ РЁБЕР: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Сеитов Д.Д.^{1*}, Некрасов К.А.¹, Купряжкин А.Я.¹, Гупта С.К.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Колледж Святого Ксавьера, г. Ахмедабад, Индия

*E-mail: seitov_1992@mail.ru

SINTERING UO_2 NANOCRYSTALS OF OCTAHEDRAL SHAPE CONTACTING ALONG AN EDGE: A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Seitov D.D.^{1*}, Nekrasov K.A.¹, Kupryazhkin A.Ya.¹, Gupta S.K.²

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ St. Xavier's College, Ahmedabad, Gujarat, India

Annotation. The process of sintering UO_2 nanocrystals of the regular octahedral shape is studied. The crystals consisted of 5460 ions each and contacted along the edges. In the temperature range from 2300 K to 3000 K, two stages of the process were observed. In the beginning, the crystallites were displaced along the adjacent (111) faces. Then, the contact area increased due to the transfer of matter from the surface of the crystallites. The sintering rate depended exponentially on the inverse temperature.

В работе исследован процесс спекания нанокристаллов стехиометрического диоксида урана. Кристаллы UO_2 имели энергетическую форму правильных усеченных октаэдров, при спекании контактировали вдоль рёбер.

Модельная система состояла из двух одинаковых кристаллитов UO_2 , каждый из которых включал 5460 ионов (1820 молекул UO_2). Кристаллиты подвергали предварительной релаксации методом молекулярной динамики при сравнительно низкой температуре 2100 K в течение 160 нс, для получения равновесной поверхности оптимальной формы.

Взаимодействие ионов урана и кислорода описывали эмпирическими парными потенциалами MOX-07, предложенными в работе [1]. Как было показано в предыдущих работах [2-4], эти потенциалы, восстановленные из зависимости постоянной решётки UO_2 от температуры, обеспечивают возможность количественного моделирования высокотемпературных процессов переноса собственных ионов UO_2 как в объёме кристалла, так и на поверхности.

Процесс спекания изучен в диапазоне температур от 2300 K до 3000 K. Наблюдались две стадии протекания процесса. На первой стадии кристаллиты смещались друг относительно друга вдоль смежных граней (111). Затем площадь контакта увеличивалась за счёт переноса вещества с поверхности кристаллитов вплоть до полного исчезновения видимой границы между ними. На этапе

поверхностного переноса вещества скорость спекания экспоненциально зависела от обратной температуры.

1. Potashnikov S.I., Boyarchenkov A.S., Nekrasov K.A., Kupryazhkin A.Ya., ISJAE 8, 43 (2007).
2. Boyarchenkov A.S., Potashnikov S.I., Nekrasov K.A., Kupryazhkin A.Ya., J. Nucl. Mater. 421, 1 (2012).
3. Potashnikov S.I., Boyarchenkov A.S., Nekrasov K.A., Kupryazhkin A.Ya., J. Nucl. Mater. 433, 215 (2013).
4. Boyarchenkov A.S., Potashnikov S.I., Nekrasov K.A., Kupryazhkin A.Ya., J. Nucl. Mater. 442, 148 (2013).

ПРОГРАММНАЯ ПЛАТФОРМА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕПЛОВЫХ СХЕМ ТЭС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ MATLAB SIMULINK

Селезнев Е.С.*, Худяков П.Ю.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: seleznev-ekb@mail.ru

SOFTWARE PLATFORM FOR CALCULATING THERMAL SCHEMES OF TPP USING MATLAB SIMULINK

Seleznev E.S.*, Khudyakov P.Yu.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Annotation. The paper discusses the main stages of modeling and calculating thermal schemes of thermal power plants in their own software product based on the mathematical package MATLAB Simulink.

Актуальной является задача автоматизации оптимизационных расчетов тепловых схем ТЭС в научных исследованиях. Основой для полного функционирования создаваемого расчетного программного продукта является собственная программа Water-Steam Calculator (WSC) [1] с внутренней библиотекой функций на основе формуляции IAPWS-IF97 [2], которые позволяют вычислять параметры воды и водяного пара.

Основная концепция работы продукта делится на несколько этапов. На первом этапе пользователь в среде MATLAB Simulink производит разработку и построение моделируемой тепловой схемы в виде функциональных блоков и начальных условий. Начальным условием, например, может быть указан процент от общего расхода пара, направляемого в данный отбор турбины. В это же время, начальные параметры пара не указываются, и не инициализируется библиотека свойств воды и водяного пара WSC.